

A numerical study of non-spherical particle systems using the discrete element model (DEM)

Doctoral Thesis**Author(s):**

Lu, Guang

Publication date:

2016

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010744395>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

DISS. ETH NO. 23738

***A NUMERICAL STUDY OF NON-SPHERICAL PARTICLE
SYSTEMS USING THE DISCRETE ELEMENT MODEL (DEM)***

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

GUANG LU

M. Sc. in Mechatronic Engineering, Southeast University, China

born on 19.09.1984

citizen of P.R. China

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Christoph Müller, examiner

Prof. Dr. Niels Deen, co-examiner

Prof. Dr. Stefan Heinrich, co-examiner

2016

Abstract

Granular systems are inherently complex and their experimental study is hampered by their opaqueness, which largely prohibits the use of conventional optical techniques that have been applied with great success in classic fluid dynamics. In view of this, computational techniques, e.g. the discrete element method (DEM), have emerged as powerful tools to investigate both static and dynamic phenomena in granular systems. Nonetheless, to date most numerical studies have concentrated on spherical particles with only very few investigations probing the effect of particle shape on the behaviour of granular systems.

In this work, numerical models were developed and implemented to simulate non-spherical particles with an in-house DEM model. Here, one modelling approach relied on the use of the three-dimensional super-quadric equation to describe a non-spherical particle. In a second approach several spheres were “glued” together to model a non-spherical particle shape.

In the super-quadric-based framework, two numerical approaches to detect contacts in non-spherical particle systems that are based on a ‘discrete function representation’ (DFR) and a ‘continuous function representation’ (CFR) were formulated and implemented. The accuracy, stability and efficiency of the numerical methods proposed were assessed critically by performing benchmark simulations. The accuracy of the anisotropic DEM simulations was validated further by simulating a chain of toppling dominoes and comparing the numerically obtained intrinsic collision speed with experimental measurements.

Subsequently, the effect of particle shape on the dynamics of particles in a horizontal, rotating cylinder was studied. The cylinder was filled with a “mono-shaped” or a “bi-shaped” granular material. Here, the focus lies on the following two phenomena: the axial diffusion (often also referred to as dispersion) of non-spherical particles and particle-shape induced radial segregation. It was observed that the axial dispersion of cubic particles follows Fick’s second law, similar to gases and spherical particles. Similar to the behavior of spheres, the dispersion coefficient of cubes depends on (i) the rotational speed of the cylinder ω , (ii) gravitational acceleration g and (iii) the particle size d , satisfying the law $D_{ax} \propto \omega^{1-2\lambda} g^\lambda d^{2-\lambda}$ with $\lambda \approx 0.15$ ($\lambda \approx 0.1$ for beds of spheres [J. R. Third, D. M. Scott, and S. A. Scott. Axial dispersion of granular material in horizontal rotating cylinders. *Powder Technology*, 203:510 – 517, 2010]). An important finding was that for a given fill level of the cylinder, the rate of axial dispersion increases with increasing particle blockiness, i.e. cubic particles disperse appreciably faster

than spheres of equal volume, a somewhat counter-intuitive observation. It was possible to relate the increasing dispersion rate to an increasing dynamic angle of repose and, thus, a higher kinetic energy of cubic particles in the avalanching region.

Concerning particle-shape induced radial segregation it was observed that (i) non-spherical particles accumulate in the core, while volume equivalent spheres remain largely in the annulus region of the bed and (ii) the aspect ratio of a particle has a greater influence on radial segregation than particle blockiness. Importantly, we found that the percolation mechanism that drives size-induced segregation is not the underlying reason for shape-induced segregation. Instead, we propose that the poorer mobility of non-spherical particles, when compared to that of spheres, controls radial segregation.

In the last chapter the effect of particle shape on the packing morphology and the stress transmission within the deposits is evaluated. Straight and curved, elongated spherocylinders were modelled by the composite spheres method. It was observed that rough and curved particles of small aspect ratios exhibit a greater tendency for interlocking, leading to the formation of more crystallized packing structures and, thus, favoring stress transmission in the gravitational direction.

Zusammenfassung

Granulare Systeme sind von Natur aus komplex und können wegen ihrer Undurchsichtigkeit experimentell nur sehr schwierig untersucht werden. Vor allem optische Messverfahren, die erfolgreich in der klassischen Strömungsmechanik angewendet wurden, sind für diese undurchsichtigen Systeme unbrauchbar. Angesichts dieser Tatsache haben sich numerische Methoden, z.B. die diskrete Elemente-Methode (DEM), als leistungsstarke Werkzeuge etabliert, um sowohl statische als auch dynamische Phänomene in granularen Systemen zu untersuchen. Die meisten der bisher durchgeführten numerischen Untersuchungen waren auf kugelförmige Partikel beschränkt. Der Einfluss der Partikel-Form auf ihr dynamisches Verhalten wurde bisher jedoch häufig vernachlässigt.

In dieser Arbeit wurden neue numerische Modelle entwickelt, um Partikeln, welche nicht kugelförmig sind, zu simulieren. Einer dieser Modellierungs-Ansätze basiert auf der Verwendung von dreidimensionalen Quadriken, einem mathematischen Ansatz um räumliche Gebilde parametrisch zu beschreiben. Beim zweiten Ansatz wurden mehrere Kugeln fest miteinander verbunden um beliebige Partikelformen zu beschreiben.

Im Ansatz der dreidimensionalen Quariken wurden zwei verschiedene Methoden verwendet um die Berührungen zwischen Partikeln zu detektieren: Ein Ansatz basiert auf der diskreten Darstellung von Funktionen (Discrete Function Representation), der andere auf einer kontinuierlichen Darstellung von Funktionen (Continuous Function Representation). Die Genauigkeit, Stabilität und Effizienz der entwickelten numerischen Methoden wurde rigoros an Benchmark-Simulationen analysiert. Zum Beispiel wurde die Genauigkeit der anisotropen DEM-Simulationen überprüft, indem die simulierte Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Reihe umfallender Dominosteine mit experimentellen Messungen verglichen wurden.

Anschliessend wurde die Wirkung der Partikelform auf die Bewegung in einem horizontal rotierenden Zylinder untersucht. Der Zylinder wurde mit Partikeln einer bestimmten Form bzw. mit Partikeln zweier unterschiedlicher Formen gefüllt. Vor allem zwei Phänomene wurden in diesem Zusammenhang näher untersucht und beschrieben: Partikel-Diffusion in Richtung der Zylinderachse (oft auch als axiale Dispersion bezeichnet) sowie formabhängige Segregation in radialer Richtung. Es wurde beobachtet, dass die axiale Dispersion von kubischen Teilchen dem zweiten Fick'schen Gesetz gehorcht, wie es auch in Gasen und bei kugelförmigen Partikeln der Fall ist. Der Dispersionskoeffizient der Würfel

hängt dabei von der Rotationsgeschwindigkeit des Zylinders ω , der Erdbeschleunigung g und der Partikelgrösse d ab und erfüllt das Gesetz $D_{ax} \propto \omega^{1-2\lambda} g^\lambda d^{2-\lambda}$ mit $\lambda \approx 0.15$ (für kugelförmige Partikel wurde ein Wert von $\lambda \approx 0.1$ erhalten [J. R. Third, D. M. Scott, and S. A. Scott. Axial dispersion of granular material in horizontal rotating cylinders. *Powder Technology*, 203:510 – 517, 2010]). Ein wichtiges Ergebnis dieser Untersuchungen war, dass die Geschwindigkeit der axialen Dispersion mit zunehmender Abweichung von der Kugelform, zunimmt. So dispergieren für einen gegebenen Füllstandes des Zylinders kubische Partikel deutlich schneller als Kugeln des selben Volumens, was auf den ersten Blick kontraintuitiv erscheint. Es war im Rahmen dieser Dissertation möglich dieses Phänomen zu erklären: Der dynamische Schüttwinkel für kubische Partikel ist grösser als für kugelförmige Partikel, wodurch die kinetische Energie im Lawinenbereich und damit auch die Diffusion der Partikel erhöht wird.

Des weiteren wurde beobachtet, dass es eine radiale Trennung von Partikeln aufgrund ihrer Partikelform gibt. Nicht- kugelförmigen Partikel sammeln sich dabei im Kernbereich an, während kugelförmige Partikel sich vor allem im äusseren Ringbereich des Betts ansammeln. Das Verhältnis der Kantenlängen eines Partikels (Formfaktor) hat dabei einen grösseren Einfluss auf die radiale Trennung als die Abweichung von der Kugelform. Ein wichtiges Ergebnis dieser Arbeit ist des weiteren, dass der Mechanismus des Durchsickerns, der bekannter weise die grössenabhängige Entmischung verursacht, nicht die Ursache für die beobachtete formabhängige Entmischung ist. Stattdessen schlagen wir vor, dass die schlechtere Mobilität von nicht-kugelförmigen Teilchen diese radiale Trennung verursacht.

Im letzten Kapitel wird der Einfluss der Form der Partikel auf deren Packungsstrukturen und Übertragungseigenschaften von Spannungen untersucht. Gerade und gebogene Spherozylinder wurden durch das oben beschriebene Kugel-Verbund Verfahren modelliert. Partikel, die rauh und gekrümmt sind und deren Seitenverhältnis klein ist, weisen eine stärkere Neigung zur Verzahnung auf. Dies führt zur Bildung von kristallineren Packungsstrukturen und einer begünstigten Spannungsübertragung in Richtung der Erdanziehungskraft.